معادلة شرودينغر :

تنص نظرية دي بروغلي على أن جسيماً كتلته (m) ويتحرك بسرعة مقدارها (v) يصاحبه انتشار موجي تعطى طول موجته بالمعادلة .

$$\lambda = \frac{h}{mv}$$

حيث h هو ثابت بلانك و $p = mv$ هو الزخم لهذا الجسم أي . $\lambda = \frac{h}{p}$.

ان المعنى الحقيقي لهذه النظرية هو أن الجسيمات الدقيقة (ونعني بها الالكترونات هنا) تتصرف أحياناً كموجات . ولدراسة الخاصية الموجية المصاحبة لجسم متحرك تحت تأثير قوة ما لا بد من وجود معادلة تصف كيفية انتشار هذه الموجات . وقد وضع شرودينغر هذه المعادلة والتي عرفت باسمه وعبر عن الصيغة الموجية للجسم المتحرك بدالة هي $\Psi(x,t)$ ، سماها الدالة الموجية . وتعتبر معادلة شرودينغر أهم معادلة في ميكانيك الكم وهي الأيسر والأكثر استعمالاً من الصيغ الأخرى التي وضعها كل من ديراك وهايزنبرغ .

يمكن الحصول على معادلة شرودينغر عن طريقين . الأول هو استخدام المعادلة الموجية المشتقة من قوانين الطبيعة (الفيزياء) الكلاسيكية بالإضافة الى الطبيعة الموجية للجسيمات الدقيقة التي صاغها دي بروغلي . ان ابسط انواع الموجات هي تلك الناتجة عن تذبذب وتر مشدود من نهايتيه حيث يعطى طول الموجة بالمعادلة الآتية:

$$\lambda = \frac{2L}{n}$$

حيث λ هو طول الموجة و L هو طول الوتر و n عدد المواضع التي تكون فيها سعة الذبذبة مساوية للصفر . وحسب قوانين الفيزياء الكلاسيكية تعطى ازاحة اجزاء الوتر المختلفة بالعلاقة

$$\Psi = A \sin\frac{2\pi x}{\lambda}\cos 2\pi\nu t \qquad (P) \qquad (1)$$

حيث A ثابت يساوي أقصى سعة للموجة و Ψ هي دالة تصف ما تبدو عليه الموجة في لحظة ما . و ν هو التذبذب (أو التواتر) .

ان المعادلة (P) هي حل للمعادلة التفاضلية الآتية:

$$\frac{\partial^2\Psi}{\partial x^2} = \frac{4\pi^2}{\lambda^2} A \sin\frac{2\pi x}{\lambda}\cos 2\pi\nu t$$

أي أن

$$\frac{\partial^2\Psi}{\partial x^2} = -\frac{4\pi^2}{\lambda^2}\Psi \quad \text{أو} \quad \frac{\partial^2\Psi}{\partial x^2} + \frac{4\pi^2\Psi}{\lambda^2} = 0$$

وفي الحالات التي لا تكون فيها الكميات المقاسة معتمدة على الزمن (لا تهمنا في مسائل ميكانيك الكم) . يمكن أن نكتب المعادلة السابقة (كتفاضل عادي وليس جزئي) .

$$\frac{d^2\Psi}{dx^2} + \frac{4\pi^2\Psi}{\lambda^2} = 0 \qquad (2)$$

وبما أن $\lambda = \frac{h}{p}$ اذن يمكن كتابة هذه المعادلة على الشكل الآتي .

$$\frac{d^2\Psi}{dx^2} + \frac{4\pi^2 p^2\Psi}{h^2} = 0 \qquad (3)$$

وبما أن الطاقة الكلية للمنظومة هي التي تهمنا فإننا سوف نعوض عن p في المعادلة (3) بدلالة الطاقة الكلية $E = T + U$ (حيث E هي الطاقة الكلية و T الطاقة الحركية و U هي الطاقة الكامنة) .

أي أن

$$E = \frac{p^2}{2m} + U$$

ومنه

$$p^2 = (E - U)\,2m$$

وبذلك تصبح المعادلة ③ مع العلم الآتي:

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} + \frac{8\pi^2 m}{h^2}(E-U)\psi = 0$$

وبتعويض $\hbar = \frac{h}{2\pi}$ نحصل على:

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2}(E-U)\psi = 0 \quad ④$$

وهي ما تسمى بمعادلة شرودينغر لجسيم يتحرك في اتجاه واحد (X). ويمكن تعميم معادلة شرودينغر في الاتجاهات الثلاث فتصبح المعادلة مع العلم الآتي:

$$\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2\psi}{\partial y^2} + \frac{\partial^2\psi}{\partial z^2} + \frac{2m}{\hbar^2}(E-U)\psi = 0 \quad ⑤$$

والطريقة الثانية هي اشتقاق معادلة شرودينغر من الفروض العامة لميكانيك الكم. عند نعلم من فروض آلية الكم أن معنى كون ψ هي دالة ذاتية للمؤثر $\hat{A}$ هو أن تتحقق العلاقة الآتية

$$\hat{A}\psi(q) = E\,\psi(q)$$

حيث E هي القيمة الذاتية. وإذا كانت طاقة المنظومة هي ما يعنينا في الدراسة فإن المؤثر $\hat{A}$ في هذه الحالة هو $\hat{H}$ (المؤثر الهاملتوني). أي أن

$$\hat{H}\psi(q) = E\,\psi(q).$$

فإذا اعتبرنا جسيماً كتلته m فإن طاقته الحركية هي: $T = \frac{p^2}{2m}$ وطاقته الكامنة هي U

ويكون الطاقة الكلية هي $E = T + U = \frac{p^2}{2m} + U$.

وبتعويض الزخم بدلالته في آلية الكم، نجد أن.

$$\hat{H} = \frac{-\hbar^2}{2m}\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}\right) + U$$

أي أن

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi + U\psi = E\psi$$

أي يمكن كتابتها على النحو الآتي،

$$\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi + (E-U)\psi = 0$$

وهي نفس العلاقة ⑤ التي حصلنا عليها من طريق الميكانيك الكلاسيكي.

ولكي نطبق الفروض آلية الكم ندرس جسيم يتحرك في منطقة ما (حيز) في مسار واحد؛ لنتصور جسيماً كتلته m يتحرك في الاتجاه X وليكن في صندوق يتحول مع المحور X وليكن طول ضلع هذا الصندوق هو a وأن الجهد V داخل هذا الصندوق يساوي صفراً و الجهد خارج الصندوق يصل الى ما لا نهاية، أي أن الجسيم سيبقى دائماً داخل الصندوق حيث سينعكس عند الحدود X ($x=0$, $x=a$). فإذا كانت طاقة الجسيم الكلية هي E وطاقة الجهد هي $V=0$ داخل الصندوق و $V=\infty$ خارج الصندوق. فإن المعادلة الموجية (معادلة شرودينغر) لهذا الجسيم خارج الصندوق هي

$$\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi}{dx^2}+(E-\infty)\psi=0$$

أي أن

$$\frac{d^2\psi}{dx^2}+\frac{2m}{\hbar^2}(E-\infty)\psi=0$$

$$\frac{d^2\psi}{dx^2}=\infty\psi$$

ومن الواضح أن حل هذه المعادلة هو $\psi=0$ اذا أخذنا في الحسبان دالة فاصلة لشروط ψ يمكن أن نتخطى فيها لدالة اذا تمت مفاضلتها مرتين ومعنى أن $\psi=0$ أن احتمال وجود الجسيم خارج الصندوق يساوي صفراً. وفي حالة داخل الصندوق $V=0$ أي أن.

$$\frac{d^2\psi}{dx^2}+\frac{2m}{\hbar^2}E\psi=0$$

فاذا وضعنا أن $\alpha^2=\frac{2m}{\hbar^2}E$ تصبح المعادلة على النحو الآتي.

$$\frac{d^2}{dx^2}\psi=-\alpha^2\psi$$

ولهذه المعادلة عدة حلول مقبولة ويجب أن أي حل لها له ψ ليعطي نفس الدالة مضروبة في ثابت عند مفاضلتها مرتين وهذه الدوال هي من الدوال الثلاثة الآتية:

$$\sin\alpha x \quad , \quad \cos\alpha x \quad , \quad e^{\alpha x}$$

وسوف نأخذ من هذه الحلول المقبولة الحل.

$$\psi=A\sin\alpha x$$

1 ومن الشروط الاولية في هذه المسألة هي أن $\psi_0=\psi_a=0$

أي أن

$$\psi_0=A\sin 0\alpha=0$$

$$\psi_a=A\sin a\alpha=0$$

ولكي تكون الدالة ψ_a مساوية للصفر يجب أن يكون $a\alpha=n\pi$. اذن

$$\alpha=\frac{n\pi}{a} \quad , \quad \alpha^2=\frac{n^2\pi^2}{a^2}$$

وبالتالي نستطيع أن نعرض مع دالة ذاتية (مناظرة) لكل عدد صحيح لـ (n)

أي

$$\psi_n=A\sin\frac{n\pi x}{a}$$

ونستطيع أن نحسب الطاقة E_n على النحو الآتي:

$$\alpha^2=\frac{n^2\pi^2}{a^2}=\frac{2mE_n}{\hbar^2} \Rightarrow E_n=\frac{n^2\pi^2\hbar^2}{2ma^2}$$

وبما أن $\hbar=\frac{h}{2\pi}$ اذن

$$E_n=\frac{n^2h^2}{8ma^2}$$

لايجاد قيمة الثابتة A سوف نطبق خصائص الدالة الجيدة ψ وهي أن

$$\int_0^a\psi^2dt=1 \Rightarrow \int_0^a\psi^2dx=\int_0^a A\sin\frac{n\pi x}{a}\cdot A\sin\frac{n\pi x}{a}\,dx=$$

$$=A^2\int_0^a\left[\sin\frac{n\pi x}{a}\right]^2dx=1$$

وسوف نستخدم القاعدة العامة في التكاملات.

التربيعية

$$\int_0^a\sin^2bx\,dx=\frac{x}{2}-\frac{1}{4b}\sin(2bx)-0$$

ومن مسائلنا هنا فإن $b = \frac{n\pi}{a}$

إذن

$$\int_0^a \psi^2 dx = A^2 \left[\frac{x}{2} - \frac{1}{4}\frac{a}{n\pi} \sin \frac{2n\pi x}{a} \right]_0^a$$

$$= A^2 \left[\frac{a}{2} - \frac{1}{4}\frac{a}{n\pi} \sin 2n\pi \right]$$

وحيث أن قيمة هذا التكامل عندما تتحول x الى a هو $\frac{a}{2}$ فيكون.

$$1 = A^2 \frac{a}{2} \Rightarrow \frac{2}{a} = A^2 \Rightarrow A = \sqrt{\frac{2}{a}}$$

إذن فإن الناتج المطلوب.

$$\psi_n = \left(\frac{2}{a}\right)^{1/2} \sin \frac{n\pi x}{a}$$

تمرين.

ما هو احتمال وجود جسيم متحرك في اتجاه x في المجال $x = 0$ و $x = \frac{1}{2}a$

$x \to 0 \to \frac{1}{2}a$

وذلك بالمستوى الطاقي الثاني.